



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

sid.inpe.br/mtc-m21b/2014/11.11.17.19-MAN

CÁLCULO DO TAMANHO DOS CRISTALITOS ATRAVÉS DO MODELO DE CONFINAMENTO DE FÔNOS

Miguel Angelo do Amaral Junior

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP5W34M/3HCUGSS>>

INPE
São José dos Campos
2014

PUBLICADO POR:

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Gabinete do Diretor (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970

São José dos Campos - SP - Brasil

Tel.:(012) 3208-6923/6921

Fax: (012) 3208-6919

E-mail: pubtc@sid.inpe.br

CONSELHO DE EDITORAÇÃO E PRESERVAÇÃO DA PRODUÇÃO INTELLECTUAL DO INPE (RE/DIR-204):**Presidente:**

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Membros:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT)

Dr. Amauri Silva Montes - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espaciais (ETE)

Dr. André de Castro Milone - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA)

Dr. Joaquim José Barroso de Castro - Centro de Tecnologias Espaciais (CTE)

Dr. Manoel Alonso Gan - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT)

Dr^a Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação

Dr. Plínio Carlos Alvalá - Centro de Ciência do Sistema Terrestre (CST)

BIBLIOTECA DIGITAL:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT)

REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:

Maria Tereza Smith de Brito - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Yolanda Ribeiro da Silva Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID)

EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:

Maria Tereza Smith de Brito - Serviço de Informação e Documentação (SID)

André Luis Dias Fernandes - Serviço de Informação e Documentação (SID)



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

sid.inpe.br/mtc-m21b/2014/11.11.17.19-MAN

CÁLCULO DO TAMANHO DOS CRISTALITOS ATRAVÉS DO MODELO DE CONFINAMENTO DE FÔNOS

Miguel Angelo do Amaral Junior

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP5W34M/3HCUGSS>>

INPE
São José dos Campos
2014



Esta obra foi licenciada sob uma Licença Creative Commons Atribuição-NãoComercial 3.0 Não Adaptada.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 3.0 Unported License.



Manual do Programa

“Cálculo do Tamanho dos Cristalitos através do Modelo de Confinamento de Fônons.”

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

O programa consiste em simular o espectro Raman de primeira ordem do silício poroso através do modelo de confinamento de fônons (Richter, 1981). O programa armazena o deslocamento Raman, a intensidade em vetores x e y , e realiza a integral do modelo com os valores experimentais assim obtidos.

Este programa já foi utilizado anteriormente por ex-alunos do grupo Laboratório de Eletroquímica e Materiais Carbonosos (LABEMAC). Iniciou-se com Patrícia Abramof (Abramof, 2006) para estimar o tamanho dos cristalitos sob o silício poroso produzido por ataque químico. Depois foi utilizado por Sandra Ramos (Ramos, 2004) para estimar o tamanho dos cristalitos sob amostras de diamante. Este programa foi aprimorado, de tal modo que, introduziu-se uma interface gráfica e melhorou-se a rotina de cálculo. Para mais informações sobre o cálculo realizado, acesse a dissertação de mestrado: "Produção de silício poroso por processo eletroquímico e estudos da evolução morfológica e do tamanho dos cristalitos" (Amaral, 2014).

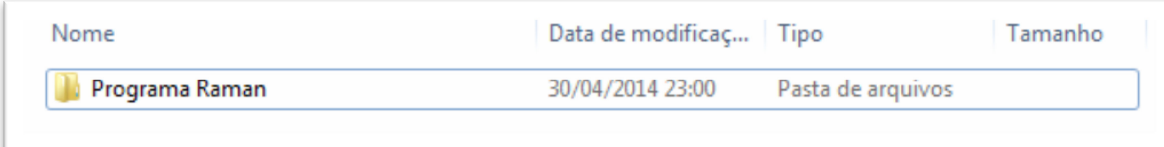
Abril de 2014

COMO UTILIZAR O PROGRAMA

O programa deve ser instalado em máquinas que contenham o sistema operacional Windows (Versões: XP, Vista, 7 ou 8). Deve-se também instalar a Linguagem de programação Python em seu computador (Python versão 2.7 link: www.python.org). Para realizar os cálculos e utilizar a interface gráfica é necessário instalar algumas bibliotecas que complementam o Python:

- Numpy (<http://www.numpy.org/>)
- Scipy (<http://www.scipy.org/>)
- Matplotlib (<http://www.matplotlib.org/>)

Para organizar os resultados, crie uma pasta qualquer com nome, por exemplo, “Programa Raman” (Figura 1).




Nome	Data de modificaç...	Tipo	Tamanho
 Programa Raman	30/04/2014 23:00	Pasta de arquivos	

Figura 1: Pasta com nome Programa Raman.

Faça o “download” do programa na biblioteca online do INPE (link: 8JMKD3MGP5W34M/3H5F662). Em seguida, abra a pasta “Programa Raman” e copie o programa em formato python (com extensão “.py”) para dentro da pasta (Figura 2). Então, crie uma pasta com o nome “Dados”. Dentro da pasta “Dados”, coloque os “arquivos.ASC” do espectro Raman.

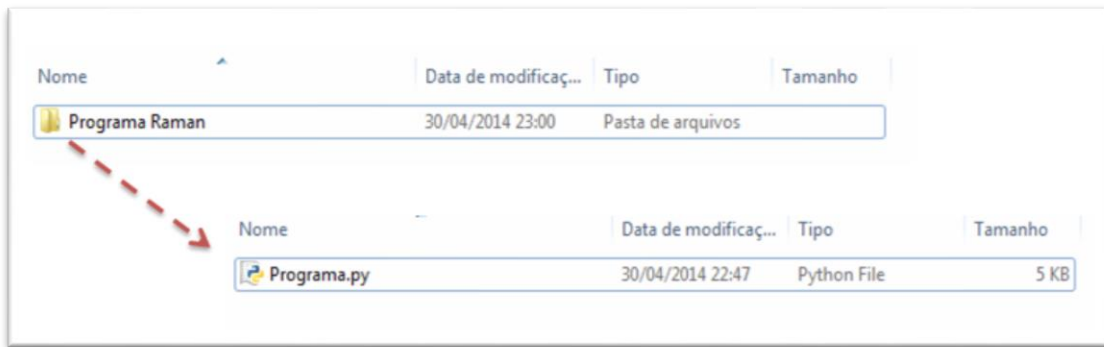


Figura 2: Copiar o programa para pasta “Programa Raman”.

Para facilitar o usuário, não será necessário manipular os dados dos espectros Raman extraídos do aparelho (MicroRaman Sistema 2000 da Renishaw – LAS), sendo assim, basta apenas copiar os dados para a pasta “Dados”. A Figura 3 mostra como estão organizados os dados do “arquivo.ASC”, que são extraídos do aparelho situado no LAS. Desta forma o programa já pode ser executado.

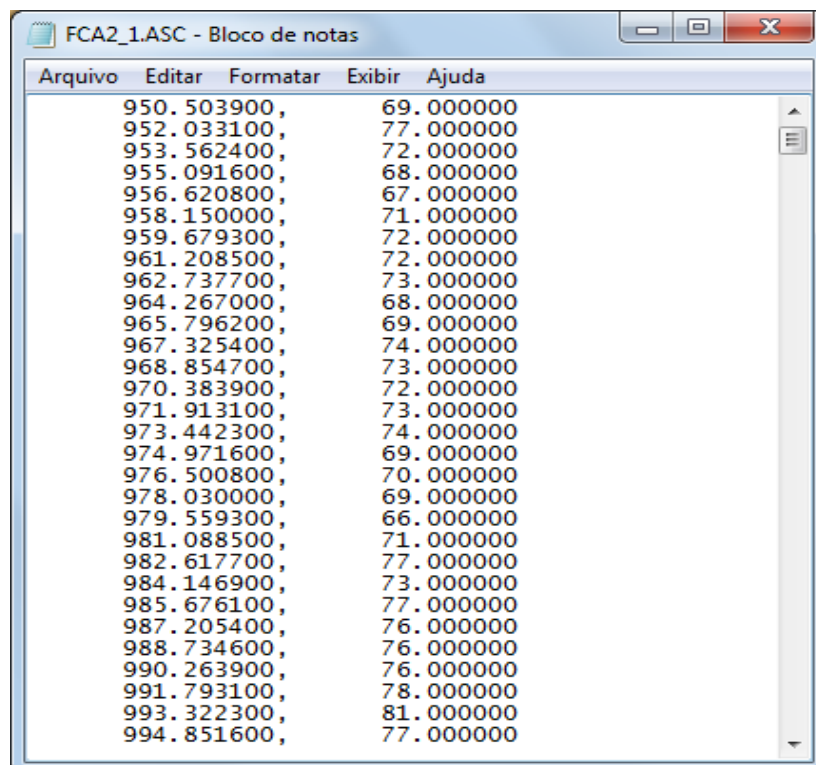


Figura 3: Exemplo de um “arquivo.ASC” obtido do equipamento Raman.

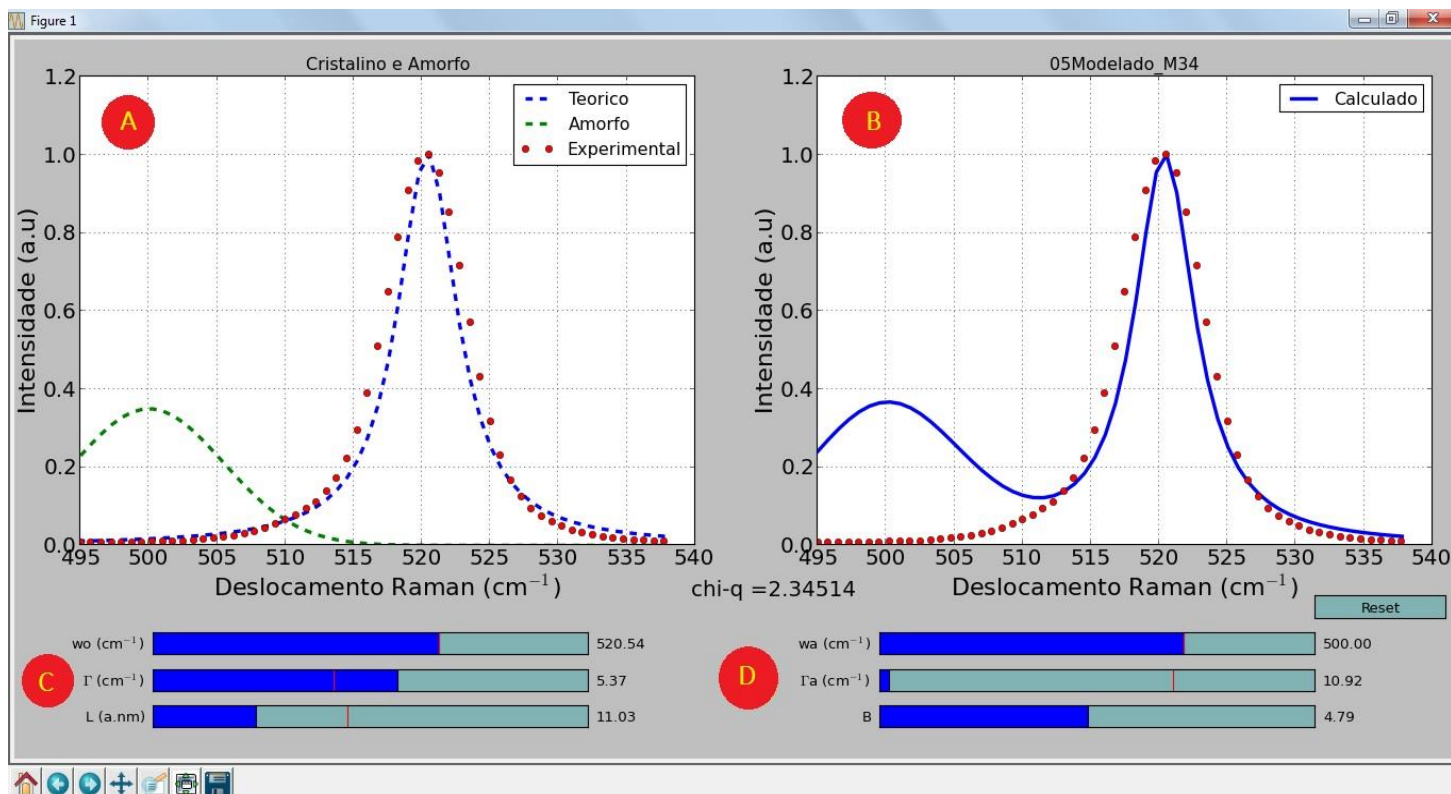


Figura 4: Ilustração do programa desenvolvido para cálculo do tamanho dos cristalitos. A-) Os pontos experimentais estão em vermelho, a linha tracejada azul representa o modelo de confinamento de fônons e a linha tracejada verde representa a gaussiana para região amorfa. B-) Soma das intensidades do modelo de Richter e o Espectro amorfo(Gaussiana).C-) Variáveis do modelo de Richter. D-) Variáveis da Gaussiana.

Após realizar todos os processos descrito anteriormente, basta executar o programa “Programa.py” (dois clicks), e a Figura 4 será exibida. Na região A-) foi utilizado o cálculo do modelo de confinamento de fônons e da Gaussiana separadamente, afim de melhorar o ajuste manual. Após o melhor ajuste, a região B-) do programa exhibe a soma das duas equações. Na região C-) foram utilizadas barras, que servem para alterar os valores das variáveis da equação do modelo de confinamento de fônons: r (largura a meia altura), w_0 (posição do pico) e L (tamanho do cristalito). Na região D-) as barras alteram apenas os valores das variáveis da gaussiana: w_a (posição do pico) , (largura a meia altura) e B (constante de proporcionalidade). Para salvar algum ajuste desejado, basta clicar na figura com formato de disquete, situada no canto inferior esquerdo (Figura 4).

A Figura 4 tem como objetivo principal facilitar a compreensão da equação do modelo de confinamento de fônons (Richter, 1981). Assim, o usuário pode variar cada parâmetro através da barra e observar as variações que ocorrem no gráfico.

$$I(w) \cong A \int \frac{4\pi \cdot q^2 \cdot (e^{-q^2 L/4}) dq}{\left(w - \left(w_0 - 120 \left(\frac{qa_0}{2\pi} \right)^2 \right) \right)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2} \right)^2} + \frac{B}{\Gamma_a \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \right)} e^{\frac{-2(w-w_a)}{\Gamma_a^2}} \quad (1.1)$$

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.

- ABRAMOF, P. G. **Silício poroso obtido por ataque eletroquímico**. 2006. 165f. (INPE-14496-TDI/1176) Tese (Doutorado em Engenharia e Tecnologia Espaciais/ Ciência e Tecnologia de Materiais e Sensores) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos, 2006. Disponível em: <<http://urlib.net/sid.inpe.br/MTC-m13@80/2006/05.30.17.15>>. Acesso em: 21 fev. 2014.
- ABRAMOF, P. G.; FERREIRA N. G.; BELOTO, A. F.; UETA A. Y. Investigation of nanostructured porous silicon by Raman spectroscopy and atomic force microscopy. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 338-340, p.139-142, 2004.
- AMARAL JUNIOR, M. A. **Produção de silício poroso por processo eletroquímico e estudos da evolução morfológica e do tamanho dos cristalitos**. 2014. 105 p. (sid.inpe.br/mtc-m19/2014/02.06.16.18-TDI). Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais e Sensores) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos, 2014. Disponível em: <<http://urlib.net/8JMKD3MGP7W/3FMP3NB>>. Acesso em: 05 set. 2014.
- RAMOS, S. C. **Filme de diamante nanocristalino: efeito de confinamento e cálculo da tensão residual a partir de espectroscopia de espalhamento Raman**. 2007. 92 p. (INPE-15189-TDI/1298). Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais e Sensores) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2007. Disponível em: <<http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m17@80/2007/11.20.17.39>>. Acesso em: 26 fev. 2014.
- RICHTER, H.; WANG, Z. P.; LEY, L. The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon. **Solid State Communications**, v.39, p. 625-629, 1981.